

ОТЗЫВ

официального оппонента, доктора физико-математических наук, Свисткова Александра Львовича на диссертационную работу Федотова Алексея Юрьевича «Многоуровневое математическое моделирование процессов формирования наноструктур в газовой среде», представленной на соискание ученой степени доктора технических наук по специальности 1.2.2 – Математическое моделирование, численные методы и комплексы программ

Актуальность темы. Диссертационная работа А.Ю. Федотова посвящена решению актуальной задачи исследования процессов формирования наноструктур в газовой среде. В основу положен предложенный автором подход для выполнения многоуровневого моделирования. Вычислительное моделирование в диссертационной работе осуществлено с использованием хорошо известных программ и разработанных автором собственных программ. Большая часть работы посвящена использованию предлагаемого подхода и программного комплекса к решению широко класса прикладных проблем.

Тема работы является актуальной и ее можно отнести к работам, осуществляемым на переднем крае современных исследований. Это многоуровневое моделирование явлений в наном мире, разработка алгоритмов расчета и программного обеспечения для вычислительного моделирования, осуществляемого на стыке наук. Исследования в этой области являются необходимым шагом для понимания процессов формирования структур в газовой среде. Они необходимы для разработки и внедрения новых нанотехнологий.

Научная новизна и практическая значимость исследований. Новизной работы является комплексный подход к решению рассматриваемых проблем. Учитываются особенности физико-математического описания поведения объектов на разных масштабных уровнях. Моделирование ведется с привлечением квантовой механики, молекулярной динамики, мезодинамики частиц. На уровнях квантовой механики и молекулярной динамики использованы имеющиеся модели и алгоритмы вычислений. Новизна работы состоит в конкретизации перехода от молекулярного к мезоуровню, в построении модели мезодинамики частиц и ее вычислительной реализации. Создан проблемно ориентированный программный комплекс для вычислительного моделирования процессов формирования, конденсации, движения и роста наноструктур в газообразных средах. Предложены алгоритмы объединения нанообъектов, увеличения пространственного объема и выбора шага по времени.

Значимость работы хорошо иллюстрируется приведенными в диссертации примерами решения важных прикладных задач. Это использование наноструктур для питания растений из газовой среды, результаты статистического анализа процесса термического синтеза, исследование использования наноструктур при работе пожаротушающего газогенератора, анализ создания наноэлементов регулируемой структуры на темплатах кремния, исследования влияния режимов молекулярно-лучевой эпитаксии на механизмы образования и роста нанопленок, описания наноструктур на подложках пористого оксида алюминия. Это только небольшой класс проблем, которые с помощью предложенной методики и комплекса программ могут быть исследованы с помощью вычислительного моделирования.

Обоснованность и достоверность научных положений и выводов. В диссертационной работе большое внимание уделено проверке правильности теоретических положений и тестированию программ. Этому посвящена большая часть второй главы диссертации. Сравнение идет с известными литературными данными, с результатами расчетов, полученных разными методами. Осуществляется так же и в других главах сравнение результатов решаемых задач с экспериментальными данными.

Рекомендации по использованию результатов диссертации. Работа рекомендуется использовать в научных и научно-технических центрах, в промышленных лабораториях для анализа процессов и совершенствования технологий, связанных с образованием наноструктур в газообразной среде. Программный комплекс открывает большие возможности для использования его в образовательном процессе. Студентам открывается возможность в рамках практических занятий, курсовых и дипломных работ с помощью программного комплекса приобрести глубокие знания по квантовой механике, молекулярной динамике, мезоскопической динамике, по используемым в физике методам вычислений.

Краткая характеристика основного содержания диссертации. Диссертационная работа А.Ю. Федотова состоит из введения, семи глав, заключения, перечня основных сокращений и обозначений, списка использованных источников и трех приложений. Содержит 210 иллюстраций и 7 таблиц. Список литературы имеет ссылки на 299 источников.

В первой главе идет подробный анализ существующих моделей и методов решения задач с помощью квантовой механики, молекулярной динамики, мезодинамики частиц. Предложено осуществлять многоуровневое исследование процессов конденсации атомов и молекул в наноструктуры в газовой среде. При этом интересным моментом работы является переход к моделированию процессов на уровне мезодинамики частиц. Автор предлагает свой вариант определяющих уравнений. В главе дается информация, какие данные для моделирования можно получить на более низком уровне и какие допущения предлагается

использовать на более высоком уровне. Дан подробный анализ потенциалов возможных взаимодействий элементов рассматриваемых систем. Сформулирован критерий, при выполнении которого две наночастицы объединяются в одну частицу с большей массой. Для моделирования граничных условий предложено использовать периодические ячейки, с использованием соседних объемов с симметричным расположением объектов в них и движением этих объектов.

В второй главе дается информация об используемом для решения задач программном комплексе. Подробно изложена структура комплекса, особенности его работы, назначение каждого входящего в комплекс блока, личный вклад автора в его разработке и информация о фрагментах комплекса, в которых применяются готовые программы других разработчиков. Осуществлена проверка точности вычислений на примере решения тестовых задач и анализ сходимости решений.

В третьей главе исследуется процесс внесения минеральных солей в виде наноструктур через поры растений и последующего их питания. В результате анализа состава газовой среды, образующейся после сжигания таблетки с горючим материалом и минеральными солями, получено распределение по размерам молекул. Для получения равновесной конфигурации молекул и определения энергетических констант силовых потенциалов использовались уравнения квантовой механики. Информация, полученная моделированием методом молекулярной динамики, была использована в качестве начальных данных для дальнейшего исследования аппаратом мезодинамики частиц. При решении задач в рамках мезодинамики использовано предложенное автором увеличение в расчетах пространственного и временного масштабов системы. Исследована возможность регулирования процесса образования и роста наноэлементов для подкормки растений. Проведена серия экспериментальных исследований. Получено удовлетворительное совпадение с расчетными значениями распределения наночастиц по размерам. Определен состав формируемых нанокластеров.

В четвертой главе осуществлено исследование процесса испарения объемного материала, насыщения и конденсации с целью получения наноструктур, стабилизированных по составу и свойствам. Выполнены вычислительные эксперименты с целью анализа процессов конденсации и роста двухкомпонентных металлических наносистем из серебра и меди. Осуществлено моделирование процессов формирования и роста двухкомпонентных серебряно-цинковых наноструктур. Исследовано также формирование трехкомпонентных металлических наноструктур. Интересным результатом стало обнаружение следующего явления. Рассматривалось взаимодействие атомов серебра и цинка. Обнаружено, что при

соприкосновении наночастиц их структура начинает реорганизовываться. Внутри объединенной наноструктуры оказывается новое ядро, образованное сгруппированными центральными слоями серебряных областей двух предыдущих нанообъектов. Рассмотрены дополнительно процессы с трехкомпонентными системами в качестве исходных элементов у которых рассматривались комбинированные смеси и сплавы из атомов золота, серебра и цинка. В работе осуществлен поиск законов распределения параметров наноструктур, получаемых в результате вычислительного моделирования.

Пятая глава посвящена проблемам использования многокомпонентных наносистем в аэрозольных пожаротушающих генераторах. Эти аэрозоли не токсичны, экологически безопасны, обладают высокой проникающей способностью, обладают диэлектрической непроводимостью. Уравнения квантовой механики позволили получить необходимые данные параметров силовых полей и равновесной структуры основных типов молекул. Молекулярная динамика использована для моделирования процессов в аэрозоле на стадии охлаждения. Установлено, что к активно конденсирующимся элементам относятся молекулы карбоната калия, воды, оксидов магния и кальция. Наибольшую интенсивность объединения в нанокластеры имеет карбонат калия. Исследована динамика изменения химического состава смеси. Выполнены экспериментальные исследования наноструктур в аэрозолях. Получены статистические характеристики распределения наночастиц. Сравнения экспериментальных данных и результатов вычислительного моделирования распределений дали удовлетворительное соответствие.

В шестой главе вычислительное моделирование использовано для исследования процесса нанесения покрытий путем осаждения испаряемых элементов в условиях вакуума или атмосферы инертных газов на подогреваемую подложку. Осуществлена серия вычислительных экспериментов, направленная на установление механизмов роста и особенностей формирования наноструктур, напыляемых на подложку. Исследовано образование на кремнии нанокластеров золота, галлия и золота, индия и галлия, сурьмы и кремния. Проведено исследование двуслойного осаждения. Вначале оно осуществлялось атомами одного элемента, после этого атомами другого элемента. Несомненный интерес представляет обнаружение явления сборки в наноклапты однотипных элементов. Осуществлен анализ структур, получаемых в результате напыления из разных источников под разными углами. Интересным является вывод о формировании квантовых точек при внедрении галлия и сурьмы в область кремниевой нанопленки.

В седьмой главе решаются задачи по моделированию процессов осаждения и формирования нанопленок на основе пористых темплатов из оксида алюминия (т.е. структур,

играющих организующую роль в рассматриваемом процессе). В исследуемой системе на поверхности подложки имеются нанопоры. Проведено исследование роста наноструктурированных покрытий, образованных атомами золота, серебра, титана, железа, галлия, меди, германия, палладия и платины. Целью исследования стал анализ взаимодействия нанообъектов и механизмы зарастивания пор и подложек. Изучены процессы образования как одноатомных, так и молекулярных пленок с легирующими присадками на пористых подложках. Установлены основные особенности процессов для используемых атомов. Например, обнаружено, что напыление на подложку с порой золота приводит к образованию относительно равномерной пленки с небольшим проседанием в области поры. Агломерация железа над поверхностью подложки приводит к формированию островков. В то время, как при осаждении палладия происходит формирование незарастающей воронки прямо над порой. В рамках вычислительных экспериментов осуществлен анализ зависимости механизмов роста наноструктур и нанопленок на пористых подложках от размеров полостей. Для управления процессами осаждения атомов изучены возможные способы влияния, в частности связанные с выбором угла направления осаждения и воздействием температуры спекания.

Замечания по работе.

1. Почему при объединении атомов в наночастицу (формула 1.40) не учитывается скорость движения атомов? Если одна группа атомов медленно пролетает около другой группы атомов, то силы их взаимного притяжения изменят траектории и произойдет объединение групп атомов. Если же скорости велики, то группы атомов не успеют изменить траектории и пролетят недалеко друг от друга.

2. Потенциальная энергия объединившихся в наночастицу групп атомов меньше суммы потенциальных энергий отдельных групп атомов до их столкновения (формула 1.40). Куда девается энергия при столкновении?

3. В записи уравнения (1.48) имеется неточность. Это уравнение не объективно. Сила зависит от выбора инерциальной системы отсчета. В последнем слагаемом должен быть не радиус-вектор наночастицы, а разность между радиус-вектором наночастицы и некоторым другим вектором. Вероятно, вторым вектором является центр масс системы, и он неподвижен. Но это не указано в тексте.

4. Для моделирования движения наночастиц используется стохастическое уравнение. Среди действующих сил имеется случайная сила (уравнение 1.48). Интуиция подсказывает, что это должен быть белый шум. Но об этом следует указать в тексте и привести в классическом виде формулировку этой силы.

5. При формулировке физических процессов нельзя использовать термины «целевая температура» и «шаг по времени». Природа не ставит целей и не делает конечных шагов во времени.

6. Очень интересным является формулировка уравнения для вычисления давления в рамках мезодинамике частиц (уравнение 1.104). К сожалению, в диссертации нет никаких пояснений о том, почему оно имеет такой вид.

Общее заключение. Сделанные замечания не влияют на общую высокую положительную оценку диссертации. Автореферат правильно и достаточно полно отражает содержание диссертации. Основные результаты своевременно опубликованы в ведущих международных и российских журналах. Диссертация Федотова Алексея Юрьевича «Многоуровневое математическое моделирование процессов формирования наноструктур в газовой среде», представляет собой законченное исследование, выполненное на высоком научном уровне. Диссертация «Многоуровневое математическое моделирование процессов формирования наноструктур в газовой среде» полностью соответствует паспорту специальности 1.2.2 — «Математическое моделирование, численные методы и комплексы программ» и соответствует требованиям «Положение о присуждении ученых степеней», а соискатель Федотов Алексей Юрьевич заслуживает присуждения ученой степени доктора технических наук по специальности 1.2.2 — «Математическое моделирование, численные методы и комплексы программ».

Заведующий лабораторией микромеханики структурно-неоднородных сред ИМСС УрО РАН, доктор физико-математических наук (01.02.04 — механика деформируемого твердого тела)

Свистков Александр Львович
1 сентября 2022 г.

Личну
удосто
Специ

